

148

CONTAMINACION, REMEDIACION  
Y SUS  
MODELOS MATEMATICOS

**Ismael Herrera**

Instituto de Geofísica, Universidad Nacional Autónoma de México,  
Apartado Postal 22-582, 14,000 México, D.F., México

e-mail: [iherrera@tonatiuh.igeofcu.unam.mx](mailto:iherrera@tonatiuh.igeofcu.unam.mx)

**RESUMEN**

Se comenta sobre la importancia de los problemas de contaminación y su remediación. Para el caso de las aguas subterráneas se presenta la ecuación general con base en la cual se construyen la gran diversidad de modelos necesarios en esta clase de aplicaciones. Se analizan los diversos procesos que tienen lugar en los sistemas contaminados y se discute el estado actual de la capacidad para modelarlos.

## 1. CONTAMINACIÓN Y REMEDIACIÓN

La vida contemporánea, junto con su alta productividad, se ha caracterizado por la elevadísima tasa por persona, de desperdicios que se desechan; tanto así, que los problemas de contaminación asociados, constituyen una de las mayores preocupaciones de nuestra época. Aunque el interés por la investigación y la adopción de medidas para resolverlos se inició en los países más avanzados, también en México la necesidad de estudiarlos y corregirlos es ya apremiante, y es previsible que con la entrada en vigor del Tratado de Libre Comercio de Norteamérica, la atención que reciba esta clase de problemas será creciente.

En el caso de los Estados Unidos, investigaciones realizadas en años recientes [1], han puesto en evidencia que la contaminación de suelos y aguas está sumamente extendida y que remediar esta situación requerirá de cantidades impresionantes de dinero: la estimación considerada más probable es de 750,000 millones de dólares americanos, con cotas plausibles inferior y superior de 500,000 y 1,000,000, respectivamente. El interés y los recursos disponibles para el estudio y ejecución de medidas correctivas han sido concomitantes: el objetivo principal de la Resource Conservation and Recovery Act (RCRA) es la prevención de la contaminación futura, mientras que la de la Comprehensive Environmental Response, Compensation, and Liability Act (CERCLA o Superfondo), es limpiar los sitios contaminados ya existentes.

En consecuencia, el interés de los estudios de contaminación no se limita a su detección, evaluación y previsión de su evolución futura, sino que además, incluye el desarrollo e investigación de métodos para limpiar y restaurar los sitios ya contaminados ('remediación'[2]). En el caso de la contaminación de las aguas subterráneas, en términos muy generales, el estudio de cualquier caso específico involucra tres aspectos. En primer lugar es necesario determinar si ha habido una descarga de contaminación al sistema hidrológico subterráneo y en ese caso conocer sus características, incluyendo su distribución en espacio y tiempo. Después, se deben estudiar los mecanismos de transporte y la evolución de su distribución en el espacio, así como sus interacciones con el medio circundante. El tercer aspecto a

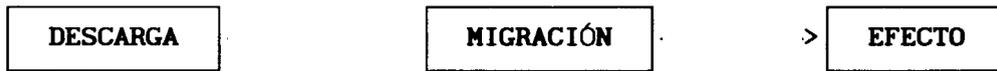
considerar está relacionado con la evaluación de los efectos que ha tenido y la previsión de los que puede tener, e incluye el estudio de los grupos humanos expuestos.

En la Fig. 1, se resumen estas consideraciones. En general es útil distinguir entre fuentes contaminantes puntuales y distribuidas (no puntuales). Frecuentemente las industriales son puntuales, pues se localizan en las fábricas y sus vecindades; en cambio las asociadas a las actividades agrícolas, son distribuidas y pueden provenir de fertilizantes y pesticidas. La evaluación de los daños producidos por la polución, depende del uso a que se detiene la zona en estudio y de si hay grupos humanos expuestos. Si la preocupación es debida a esta última causa, los aspectos médicos y de salud pública reciben la atención principal; si el uso es agrícola, serían los agrónomos; etc.

Desde el punto de vista de la modelación matemática y computacional, un aspecto sumamente interesante -por su complejidad- y que está recibiendo gran atención internacionalmente, es la migración. Cuando el contaminante ingresa al sistema subterráneo desde la superficie -que es lo más común, salvo si se trata de contaminación natural y no antropogénica- el estudio de su migración se inicia en la zona no saturada y se continúa en la saturada. Además, la amplísima variedad de sustancias que pueden originar esta clase problemas, dan lugar a situaciones y procesos también muy diversos: sistemas multifásico, con varias componentes en cada fase; intercambios físico-químicos -con la matriz sólida, particularmente procesos de 'sorción' (adsorción y sus variantes) e intercambio químico entre las diferentes componentes contenidas en los fluidos.

Por otra parte, para la aplicación eficiente del método de remediación más ampliamente utilizado, el de bombeo y tratamiento (pump and treat), es necesario modelar matemáticamente y en forma repetida la migración de los contaminantes, cuando el sistema subterráneo que se intenta restaurar se somete a bombeo. Para realizar tal modelación se deben conocer ampliamente las propiedades de los contaminantes y sus interacciones con el medio en que se encuentra. Previamente han de establecerse las ecuaciones diferenciales que constituyen la base del modelo. La selección del procedimiento de diseño, en general debe hacerse utilizando métodos

# CONTAMINACION



## • DESCARGA

- > CARACTERIZACIÓN DEL CONTAMINANTE
- > FUENTES PUNTUALES
- > FUENTES DISTRIBUIDAS

## • MIGRACIÓN

- > TRANSPORTE EN LA ZONA NO SATURADA
- > TRANSPORTE EN LA ZONA SATURADA
- > PROCESOS QUÍMICOS EN LOS FLUIDOS
- > INTERACCIÓN FÍSICO-QUÍMICA CON LA MATRIZ

## • EFECTO La evaluación de daños depende del uso.

- > DETERMINACIÓN DE LA TOXICIDAD
- > ESTUDIOS DEMOGRÁFICOS Y DE SALUD PÚBLICA
- > MONITOREO MÉDICO

FIGURA 1

de optimización. Han recibido y continúan recibiendo especial atención las técnicas numéricas para el tratamiento eficiente de frentes abruptos, así como métodos orientados a sacar provecho del supercómputo y la computación en paralelo.

## 2. SISTEMAS MULTIFÁSICOS

A pesar de la gran diversidad de situaciones que es necesario abordar en el tratamiento de problemas de contaminación, y de su diversidad, el marco general de referencia para la formulación de los modelos, posee gran sencillez y generalidad. Como ya se mencionó los sistemas subterráneos de interés para estos fines están constituidos por varias fases, en cada una de las cuales puede haber varias componentes.

### A. FASES Y COMPONENTES

Para formular el marco de referencia de los modelos mencionado antes, es necesario, en primer lugar, aclarar los conceptos de componente y fase. Las componentes son las diferentes clases de materia que componen al sistema subterráneo. Desde el punto de vista de la modelación matemática de esos sistemas, la característica esencial de las fases es que: todas las componentes contenidas en la misma fase se mueven con la misma velocidad de advección (o velocidad macroscópica).

### B. PROCESOS BÁSICOS

La migración de contaminantes es resultado de los siguientes procesos básicos:

-ADVECCIÓN.- Es el proceso por el cual el contaminante es transportado como si fuera *montado en el fluido*. La "velocidad de advección" es la "velocidad macroscópica" de las partículas del fluido.

-PROCESOS DIFUSIVOS.- Ellos son: dispersión mecánica y difusión molecular. Estos procesos son similares; son debidos a variaciones aleatorias de la velocidad microscópica de las partículas del fluido. Frecuentemente, el término difusión se refiere a la difusión molecular, mientras que dispersión mecánica, al efecto de las variaciones de la velocidad inducidas por la aleatoriedad del medio poroso.

-INTERCAMBIOS DE MASA.- Deben distinguirse las siguientes clases:

- DE LAS COMPONENTES CON EL EXTERIOR
- DE LAS COMPONENTES ENTRE SI
  - >EN LA MISMA FASE
  - >EN DIFERENTES FASES

### C. BALANCE DE MASA

Los procesos que originan la migración de los contaminantes, se integran en los modelos predictivos por medio de las ecuaciones de balance de masa. Escribiendo  $\psi^\alpha$  para la masa por unidad de volumen y  $\underline{v}^\alpha$  para la velocidad de advección, de la componente  $\alpha$ , dichas ecuaciones son [3,4]:

$$\psi_t^\alpha + \nabla \cdot (\psi^\alpha \underline{v}^\alpha) = \nabla \cdot \underline{\tau}^\alpha + g^\alpha$$

Estas ecuaciones son la expresión matemática de que cuando una fase está en movimiento el cambio de masa de cualquier componente ( $\alpha$ ) contenida en ella, es debida a intercambio de masa con las demás componentes -en la misma o en diferentes fases- y con el exterior del sistema en estudio (pertenece al exterior todo aquello que no está incluido en el modelo) y a procesos difusivos. Tal intercambio de masa, por unidad de volumen y por unidad de tiempo, está dado por  $g^\alpha$  -que es positiva cuando la componente  $\alpha$  recibe masa- y el flujo difusivo de la componente  $\alpha$ , por unidad de área y por unidad de tiempo, por  $\underline{\tau}^\alpha$ .

Frecuentemente en los modelos matemáticos es necesario considerar soluciones con discontinuidades de salto. Tales discontinuidades ocurren en superficies, llamadas choques, donde la condición de balance de masa tiene la expresión:

$$[\psi^\alpha (\underline{v}^\alpha - \underline{v}_\Sigma) - \underline{\tau}^\alpha] \cdot \underline{n} = g_\Sigma^\alpha$$

Aquí  $\underline{v}_\Sigma$  es la velocidad del choque y  $g_\Sigma^\alpha$  es la masa que recibe la componente  $\alpha$  -por unidad de área del choque y tiempo- de las demás componentes y del exterior.

### 4. PROCESOS DIFUSIVOS

Los modelos más ampliamente utilizados para los procesos difusivos, son los modelos de Fick. Para la difusión molecular da:

$-\phi D_m \nabla c^\alpha$ . La dispersión mecánica está fuertemente influida por la velocidad advectiva de la fase correspondiente, lo que provoca que el modelo de Fick correspondiente sea marcadamente anisotrópico, con un flujo difusivo longitudinal en la dirección de la velocidad, generalmente preponderante, dado por

$$-a_L |\underline{v}^\alpha| \text{Proj}_L \nabla c^\alpha$$

y otro transversal, en las direcciones perpendiculares a la velocidad de advección, dado por

$$-a_T |\underline{v}^\alpha| \text{Proj}_T \nabla c^\alpha$$

donde  $\text{Proj}_L$  y  $\text{Proj}_T$ , son las proyecciones en la dirección de flujo y en el plano transversal, respectivamente. Usualmente  $a_L > a_T$ , pues como ya se mencionó, la dispersión mecánica es generalmente mayor en la dirección del flujo que en las direcciones transversales.

## 5. INTERCAMBIOS DE MASA

De acuerdo con la clasificación de los intercambios de masa introducida previamente, se discuten a continuación las categorías correspondientes.

### A. CON EL EXTERIOR

Los tipos principales que es necesario considerar en los modelos son extracción de fluidos por medio de pozos -cuando para ellos se adoptan modelos distribuidos, en vez de incorporarlos a través de condiciones de frontera-, decaimiento radioactivo, procesos de sorción -estos procesos implican intercambios con el exterior, porque solamente los fluidos se incorporan en los modelos-, y algún otro tipo de intercambio químico con la matriz.

### B. ENTRE COMPONENTES DE LA MISMA FASE

Reacciones químicas tales como oxidación/reducción, procesos ácido/base o sustitución/hidrólisis (ver Tabla 1). Merece mención por su importancia en métodos de remediación, la biodegradación.

### C. ENTRE DIFERENTES FASES

Un proceso importante es el cambio de estado líquido/gas, que está gobernado por la ecuación de estado del fluido de que se trate. En las Tablas 1 a 3 se resume un estado del arte en materia de conocimiento de los intercambios de masa de interés en problemas de contaminación, incluyendo intercambios entre diversas fases [5].

TABLA 1

INTERCAMBIO DE MASA

DECAIMIENTO RADIOACTIVO

$$\text{Rapidez} = -\lambda c$$

Estado actual: *Bien establecido*

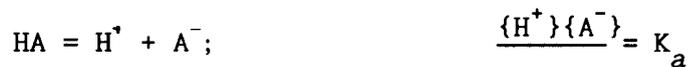
REACCIONES QUÍMICAS

Oxidación/reducción



Estado actual: *Bien establecido*

Procesos ácido/base



Estado actual: *Bien establecido*

Precipitación/disolución



Estado actual: *La base de datos es incompleta*

Complejación



Estado actual: *La base de datos es incompleta*

Sustitución/hidrólisis



Estado actual: *La base de datos es incompleta*

## TABLA 2

### T R A N S F E R E N C I A S   D E   F A S E

#### Sólido/Líquido

Solutos Orgánicos       $S=K_d[C]^N$  (Isotermas de Freundlich)

Estado actual: *Los parámetros de partición están incompletos*

Iones inorgánicos       $K_{ex} \frac{\{C_1^+\}(C_2 - X)}{\{C_2^+\}(C_1 - X)}$

Estado actual: *Los parámetros de partición están incompletos*

#### Líquido/Líquido

$$[C]_o = K_*[C]$$

Estado actual: *Los parámetros de partición están incompletos*

#### Líquido/gas

$$[C]_g = H[C]$$

Estado actual: *Los parámetros de partición están incompletos*

#### NOTACIÓN:

S=densidad en la fase sólida del soluto sorbido;  $K_d$ =constante de sorción;  $K_{ex}$ =coeficiente de intercambio de iones;  $K_*$ =coeficiente de distribución de fase;  $[C]$ =concentración del soluto;  $[C]_o$ =concentración en la segunda fase líquida;  $[C]_g$ =concentración de las especies volátiles en fase gas;  $\{C_1^+\}$  y  $\{C_2^+\}$ =actividades de dos cationes de intercambio en solución;  $(C_1 - X)$  y  $(C_2 - X)$ = densidades de superficie de dos cationes de intercambio;  $H$ =constante de Henry.

TABLA 3  
MECANISMOS CINETICOS

OXIDACIÓN/REDUCCIÓN

$$r_{\text{red}} = -k_{\text{red}} [N^+] [R] V$$

Estado actual: *Pobrementemente entendido*

PROCESOS ÁCIDO/BASE

Equilibrio instantáneo

$$r_{\text{ab}} = \left( \frac{K_a}{[HA] + [A^-]} \right) \left( \frac{d([HA] + [A^-])}{dt} \right)$$

Estado actual: *Bien establecido*

PRECIPITACIÓN

$$r_p = k_p A (1 - Q/K_{SO}) [C^+]^n$$

Estado actual: *Pobrementemente entendido*

DISOLUCIÓN

$$r_d = k_d A (1 - Q/K_{SO})^n$$

Estado actual: *Bien comprendido: base de datos incompleta*

COMPLEJACIÓN

$$r_{\text{com}} = k_{\text{com}} [C^+] [L^-] V$$

Estado actual: *Bien comprendido: base de datos incompleta*

SUSTITUCIÓN/HIDRÓLISIS

$$r_{\text{sub}} = k_T [RX] V; \quad k_T = k_H [H^+] + k_{OH} [OH^-] + k_N$$

Estado actual: *Bien comprendido: base de datos incompleta.*

## REFERENCES

- 1.- Russell, M., E.W. Colglazier and M.R. English, "Hazardous Waste Remediation: THE TASK AHEAD", The University of Tennessee, Waste Management Res. and Education Institute, Knoxville, TN., December, 1991.
- 2.- Charbeneau, R.J., P.B. Bedient and R.C. Loehr, "Groundwater Remediation", Technomic Publ. Co., Lancaster, PA, 1992.
- 3.- Herrera, I. and M.B. Allen, "Modelación Computacional de sistemas en Ciencias e Ingeniería. Formulación de las Ecuaciones Básicas". Comunicaciones Técnicas del Instituto de Geofísica, UNAM, Mexico, D.F., 1986.
- 4.- Allen, M.B., I. Herrera and G.F. Pinder, "Numerical Modelling in Science and Engineering", John Wiley, New York, NY, 1988.
- 5.- National Research Council (USA), "GROUND WATER MODELS: Scientific and Regulatory Applications", Water Science and Technology Board, National Academy Press, Washington D.C., 1990.